



TITLE:

1.Cu\_ $<1.8>$ SとCu<sub>2</sub>Seのマキシマムエントロピー法による構造解析  
(新潟大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1990年度))

AUTHOR(S):

山本, 一樹

---

CITATION:

山本, 一樹. 1.Cu\_ $<1.8>$ SとCu<sub>2</sub>Seのマキシマムエントロピー法による構造解析(新潟大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1990年度)). 物性研究 1991, 57(1): 94-94

ISSUE DATE:

1991-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94761>

RIGHT:

## ○新潟大学大学院理学研究科物理学専攻

- |  |       |
|--|-------|
| 1. $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$ と $\text{Cu}_2\text{Se}$ のマキシマムエントロピー法による構造解析 | 山本 一樹 |
| 2. 銅酸化物高温超伝導体の準粒子状態とその性質   | 西川泰一郎 |
| 3. 銅酸化物高温超伝導体における磁氣的相互作用   | 森 哲   |
| 4. 逆磁場配位 (FRC) プラズマの傾角モード安定性   | 菅野龍太郎 |
| 5. 非晶質 $\text{Ge}_x\text{S}_{1-x}$ 及び $\text{Ge}_x\text{Se}_{1-x}$ 化合物の構造  | 笛木 信宏 |

### 1. $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$ と $\text{Cu}_2\text{Se}$ のマキシマムエントロピー法による構造解析

山 本 一 樹

反螢石型の銅カルコゲナイド  $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$  と  $\text{Cu}_2\text{Se}$  の高温相と室温相の平均構造と、 $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$  の変調構造を単結晶 X 線回折により解析した。平均構造には主反射を使い、変調構造は主反射と 1 次 2 次衛星反射を使いマキシマムエントロピー法により構造を求めた。マキシマムエントロピー法は、モデルを仮定せず、つまり、観測データを先入観なしで処理する。また、求めるのは電子密度分布そのものである。この方法は、電子密度分布が低密度まで明確であり、データに含まれる電子密度分布に関する情報を取り出すのに有利である。

平均構造は、結晶系に cubic をとり、空間群  $F_{m3m}$  を仮定した。カルコゲン原子は面心立法格子を作り、Cu 原子はその tetrahedral 位置と trigonal 位置を占有している。 $\text{Cu}_2\text{Se}$  の高温相は octahedral 位置を大きく占有される。また高温相は超イオン伝導相であるのでこの位置を経由して Cu 原子は拡散する。一方  $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$  は高温相と室温相ともに octahedral 位置は占有されず、(00 $\bar{1}$ )、(0 $\bar{1}$ 1) 位置が占有される。両相間に大きな差は見られず、室温相は高温相がそのまま秩序化したものと考えられる。イオン拡散は、その位置を経由して行なわれる。

$\text{Cu}_{1.8}\text{S}$  の変調構造は cubic の  $\langle 111 \rangle$  方向への変調であり、そこで、結晶系に  $\langle 111 \rangle$  方向を同一とする rhombohedral をとり、空間群  $R_{3m}$  を仮定した。この構造は各位置での Cu 原子の占有率の変調が原因であり、単位胞中の 2 カ所の tetrahedral 位置の一方がかなり強く他方がある程度占有される領域から、両方弱い領域を通して、逆が強くなる領域へと移っていく。また Cu 原子は基本格子がずれた格子を作り、これが Cu 原子の薄い領域で不連続となるドメイン構造をもつ。

### 2. 銅酸化物高温超伝導体の準粒子状態とその性質

西 川 泰一郎

銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明の手がかりとして、現在この物質が示す正常状態での多くの異常な性質を理解する努力が行われている。特に、ホール係数は通常の場合と異なり、温度依存性を示し、ドーピングに対して、正孔及び電子ドーブ超伝導体共に、極めて特徴のある依存性を示す